

平成21年6月1日現在

研究種目:基盤研究(B)

研究期間:2006 ~ 2008

課題番号:18360061

研究課題名(和文) 材料の組織形成のシームレスモデル構築と材質予測

研究課題名(英文) Construction of Seamless Model for Material Microstructural Evolution and Prediction of Material Characteristics

研究代表者

富田 佳宏 (TOMITA YOSHIHIRO)

神戸大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号:10031147

研究成果の概要:

分子動力学, 離散転位動力学, 連続転位理論, フェーズフィールド法, 結晶塑性理論, 均質化法, 有限要素法を駆使し, ナノからマクロに至る材料の複数の階層の組織形成と応答をシームレスに結合するモデルを構築し, 変形, 相変態等によって創生する微視組織の予測と対応する材料の力学特性の評価も可能とする。加えて, 材料組織形成制御による所望の力学特性を具備した材料の創生への途を開く。

交付額

(金額単位:円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	5,100,000	1,530,000	6,630,000
2007年度	3,100,000	930,000	4,030,000
2008年度	3,300,000	990,000	4,290,000
年度			
年度			
総計	11,500,000	3,450,000	14,950,000

研究分野:工学

科研費の分科・細目:機械工学・機械材料・材料力学

キーワード:分子動力学、離散転位動力学、連続転位理論、Phase Field法、再結晶過程、結晶塑性理論、均質化理論、相変態

## 1. 研究開始当初の背景

材料の機能, 強度等の特性は材料の平均化した化学的な組成によって決まるのではなく, 材料固有のあるいは新たに創生・変化する階層的微視組織の影響を強く受ける。従って, 材料の微視組織の創生・変化のモデル化なら

びにそれに基づく特性評価は, 微視組織の制御・創成による材料の高機能化, 新材料の創生等において不可欠であり, 材料の微視組織とその応答を表現する適切なモデルの構築と計算機を援用したシミュレーションによって初めて可能となる。

## 2. 研究の目的

材料の組織の空間的な大きさには、原子・分子のÅからメートルの構造物にいたる、極めて大きなギャップがあり、それぞれ、ナノ、マイクロ、メゾ、マクロスコピックに分類できる。ナノスコピックでは原子レベルを、マイクロスコピックは結晶粒スケール以下の格子欠陥レベルを、メゾスコピックレベルは結晶粒レベルの格子欠陥集合を、マクロスコピックは構造物レベルをさしている。本研究では、このような、材料内に存在あるいは創生する空間的に大きなギャップを有する組織をシームレスに表現しうるモデルを構築し、各種熱力学のプロセスを受ける材料の組織形成と材質予測のために必要な手法を確立することを目的とする。加えて、所要の材質を具備させるために必要な組織の創生に、提案した手法を適用する。

## 3. 研究の方法

ナノからマクロに至る材料の各種階層の組織形成と応答をシームレスに結合するモデルを構築する基礎的な研究を以下の計画に従って推進した。

(1) 分子動力学と離散転位法の結合：転位論では明らかになっていない転位芯レベルの相互作用（例えばミスフィット転位と実在転位の切り合いなど）を分子動力学法により解明するとともに、離散転位動力学へのモデル化を行い、多数の転位の集団挙動として現れるメゾスコピックスケールの現象を解析可能とする。

(2) 離散転位動力学と連続転位理論の結合：セル組織を含めた高密度転位組織の構造安定性および力学応答に及ぼす影響について、離散転位動力学シミュレーションに基づいて系統的に調べる。とくに内部応力場との関係を明らかにし、転位集団挙動の支配方程式の解析によって評価した結果と比較することで、離散-連続転位場の連携解析手法について検討を加える。さらに、不適合度テンソルによる不均質場の数理的表現を考慮した結晶塑性FEM解析結果との比較・検討を行い、ミクロ場とマクロ場の合理的連成解析手法

を構築する。

(3) 均質化法とPhase Field法の結合：再結晶、相変態過程のPhase fieldモデルと均質化法をシームレスに結合するモデルを構築し、メゾスコピックスケールで生じている結晶構造変化に依存するマクロスケール特性を評価することを可能とし、大規模解析を行い実験結果と比較することで、各スケール間を連結する組織形成モデルの妥当性を検証する。

(4) 多結晶モデルの構築：変形あるいは温度変化に伴って結晶中に創生する微視組織の影響を反映した単結晶の夫々のすべり面における変形抵抗と変形速度の関係を律則する構成式を定式化する。こうして得られた単結晶の集合として、多結晶体の変形応答を適切に表現可能な結晶粒数、結晶形態を設定した代表体積要素を構築し、それに均質化理論を用いて、多結晶体の応答を評価する。

## 4. 研究成果

(1) 転位と析出物の相互作用について、原子間ポテンシャルが明らかでない場合に、第一原理バンド計算コードVASPを用いてLJポテンシャルにフィッティングし、分子動力学シミュレーションを行う一連のプロセスを提案した。さらに、分子動力学シミュレーションで得られた転位と析出物の相互作用を、ローカルルールとして離散転位動力学シミュレーションに組み込むことでスケールアップする手法を構築した。

(2) 場の理論に基づき微分幾何学的相互作用場を定義・定式化し、複数階層における不均質変形場の相関を陽に取り扱える理論的枠組みを構築した。さらに、同枠組みを、3種の転位下部組織と表面性状への影響に関する問題に適用し、下位のスケールでのゆらぎ(不適合度場に基づいて記述)が上位スケールのそれに及ぼす影響に関する具体例を示すとともに、3スケールを考えた場合の系全体の応答に対する安定性・不安定性評価法を提案した。

(3) 均質化法および結晶塑性論とPhase Field法をシームレスに結合するモデルを構築し、冷間加工後の静的な一次再結晶時に形成される再結晶組織、Fe-C合金の $\gamma \rightarrow \alpha$ 相変態により形成された組織を有する材料の強度評価をシ

ミュレートし、その妥当性を確認した。また、Multi Phase Field法による動的再結晶過程のマイクロ組織に依存するマクロな力学特性評価を可能とするマルチスケールモデルを構築した。

(4) 単結晶の夫々のすべり面における転位分布を、結晶塑性理論におけるすべり面におけるせん断応力の変化率とすべり速度関係を律則する構成式に反映させて得られた単結晶モデルを、適切な結晶粒数、結晶形態を設定した代表体積要素モデルの個々の結晶粒に適用し、それに均質化理論を用いて、多結晶体の応答評価にスケールアップする手法を構築した。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 28 件)

1. T. Hirouchi, T. Takaki, Y. Tomita,  
Development of Numerical Scheme for Phase Field Crystal Deformation Simulation, Computational Materials Science, 44, (2009) 1192-1197, 査読有
2. 西村正臣, 屋代如月, 富田佳宏  
アモルファス金属の局所格子不安定性解析: II. Ni と Al の不安定原子の違い, 材料, 58-1, (2008), 76-81, 査読有
3. A. Yamanaka, T. Takaki and Y. Tomita  
Elastoplastic Phase-Field Simulation of Self- and Plastic Accommodations in Cubic - Tetragonal Martensitic Transformation, Materials Science and Engineering A, (2008/7), Vol.491, 378-384
4. 屋代如月, 西村正臣, 富田佳宏  
アモルファス金属の局所格子不安定解析: I. 単元系アモルファスにおける不安定原子の役割, 材料, 57-8, (2008), 755-760, 査読有
5. T. Takaki, T. Hirouchi and Y. Tomita  
Phase-field study of interface energy effect on quantum dot morphology, Journal of Crystal Growth, 310, (2008), 2248-2253, 査読有
6. T. Takaki, T. Hirouchi, Y. Hisakuni, A. Yamanaka, Y. Tomita  
Multi-Phase-Field Model to Simulate Microstructure Evolutions during Dynamic Recrystallization, Materials Transactions, 49-11, (2008), 2559-2565, 査読有
7. Akinori Yamanaka, Tomohiro Takaki and Yoshihiro Tomita  
Multi-Phase-Field Modeling of Diffusive Solid Phase Transition in Carbon Steel during Continuous Cooling Transformation, Journal of Crystal Growth, 310-7/9, (2008), 1337-1342, 査読有
8. A. Yamanaka, T. Takaki and Y. Tomita  
Coupled Simulation of Microstructural Formation and Deformation Behavior of Ferrite-Pearlite Steel by Phase-Field Method and Homogenization Method, Materials Science and Engineering A, Vol 480/1-2, (2008), 244-252, 査読有
9. Xi Yuan, Yoshihiro Tomita, Tomoaki Ando  
A mechanical approach of nonlocal microstructures, Mech. Res. Communications 35-1/2, (2008), 126-133, 査読有
10. Isamu Riku, Koji Mimura, Yoshihiro Tomita  
Effect of size dependent cavitation on micro-to macroscopic mechanical behavior of rubber-blended polymer, Trans ASME. Journal of Engineering Materials Technology 130-2, (2008), 021017-1-9, 査読有
11. 屋代如月, 西村正臣, 富田佳宏  
単軸引張下のナノ多結晶体およびアモルファス金属の不安定挙動: 局所格子不安定解析, 材料, 57-2, (2008), 112-118, 査読有
12. Y. Tomita, K. Azuma, M. Naito  
Strain-Rate-Dependent Deformation Behavior of Carbon-Black-Filled Rubber under Monotonic and Cyclic Straining, Int. J. Mech. Sci., 50-5, (2008), 856-868, 査読有
13. 鈴木雄風, 屋代如月, 富田佳宏  
刃状およびらせん転位とミスフィット転位の転位芯相互作用: 分子動力学による

- 解析, 日本機械学会論文集, 73A-735, (2007), 1217-1224, 査読有
14. 屋代如月, Joy Rizki Pangestu, 富田佳宏  
Ni/Ni<sub>3</sub>Al 界面ミスフィット転位の構造および運動: 分子動力学による検討, 材料, 56-5, (2007), 439-444, 査読有
  15. 高木知弘, 山中晃徳, 比嘉吉一, 富田佳宏  
静的再結晶過程のPhase-fieldモデルと解析手順の構築, 日本機械学会論文集 73A-728, (2007), 428-489, 査読有
  16. T. Takaki, A. Yamanaka and Y. Tomita  
Phase-Field Modeling and Simulation of Nucleation and Growth of Recrystallized Grains, Material Science Forum, Vols. 558-559, (2007), 1195-1200, 査読有
  17. 屋代如月, 西村正臣, 久馬雅彦, 富田佳宏  
不均一系の大域的・局所的安定性: ナノ多結晶体とアモルファス金属の局所格子不安定性解析, 日本機械学会論文集, 73A-725, (2007), 66-72, 査読有
  18. 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏  
Phase-field 法による Fe-C 合金の  $\gamma \rightarrow \alpha$  変態と炭素拡散挙動の評価, 日本機械学会論文集, 73A-726, (2006), 209-215, 査読有
  19. K. Yashiro, M. Nishimura and Y. Tomita  
Deformation Analysis of Amorphous Metals Based on Atomic Elastic Stiffness Coefficients, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 14, (2006), 597-605, 査読有
  20. 山中晃徳, 高木知弘, 富田佳宏  
Fe-C 合金における Widmanstätten フェライト形成過程の Phase-field シミュレーション, 日本機械学会論文集, 72A-723, (2006), 1676-1683, 査読有
  21. Akinori Yamanaka, Tomohiro Takaki and Yoshihiro Tomita  
Phase-Field Simulation of Austenite to Ferrite Transformation and Widmanstätten Ferrite Formation in Fe-C Alloy, Material Transactions, 47-11, (2006), 2725-2731, 査読有
  22. 内田真, 富田佳宏  
部分結晶性高分子材料の球晶のマイクロからメゾスケールにおける変形挙動のモデル化と評価, 日本機械学会論文集 72A-717, (2006), 608-615, 査読有
  23. K. Yashiro, Y. Nakashima and Y. Tomita  
Discrete Dislocation Dynamics Simulation of Interfacial Dislocation Network in Gamma/Gamma-Prime Microstructure of Ni-based Superalloys, Computer Modeling in Engineering & Sciences, 11-2, (2006), 73-80, 査読有
  24. 高木知弘, 富田佳宏  
自己組織化量子ドットの形態発展と bimodal サイズ分布の Phase-Field シミュレーション, 材料, 55-10, (2006), 929-935, 査読有
  25. K. Yashiro, A. Furuta and Y. Tomita  
Nanoindentation on Crystal/Amorphous Polyethylene: A Molecular Dynamic Study, Computational Materials Sciences, 38-1 (2006), 136-143, 査読有
  26. K. Yashiro, F. Kurose, Y. Nakashima, K. Kubo, Y. Tomita and H. M. Zbib  
Discrete Dislocation Dynamics Simulation of Cutting of  $\gamma'$  Precipitate and Interfacial Dislocation Network in Ni-Based Superalloys, Int. J. Plasticity, 22, (2006), 713-723, 査読有
  27. Naghi Esmaeili and Yoshihiro Tomita  
Micro- to Macroscopic Responses of a Glass Particle-Blended Polymer in the Presence of an Interphase layer, Int. J. Mech. Sci., 48 (2006), 1186-1195, 査読有
  28. T. Takaki T. Hasebe Y. Tomita  
Two-dimensional phase-field simulation of self-assembled quantum dot formation, Journal of Crystal Growth 287, (2006) 495-499, 査読有

## 6. 研究組織

### (1)研究代表者

富田 佳宏(TOMITA YOSHIHIRO)  
神戸大学・大学院工学研究科・教授  
研究者番号：10031147

### (2)研究分担者

長谷部 忠司(HASEBE TADASHI)  
神戸大学・大学院工学研究科・准教授  
研究者番号：20237994

屋代 如月(YASHIRO KISARAGI)  
神戸大学・大学院工学研究科・准教授  
研究者番号：50311775

高木 知弘(TAKAKI TOMOHIRO)  
京都工芸繊維大学・工芸学研究科・准教授  
研究者番号：50294260

### (3)連携研究者